

Санкт-Петербургский государственный университет

Механика и математическое моделирование

Механика деформируемого твердого тела

Рейнберг Наталья Андреевна

Моделирование поведения жидкостей внутри углеродных нанотрубок
методом молекулярной динамики

Магистерская диссертация

Научный руководитель:

Член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н., профессор

Индейцев Д. А

Рецензент:

Д.т.н., г.н.с. ИПМаш РАН

Абрамян А. К.

Санкт-Петербург

2016

SAINT-PETERSBURG STATE UNIVERSITY

Mechanics and Mathematical Modelling

Solid mechanics

Natalia Reinberg

Molecular dynamics modelling of liquid behaviour inside carbon nanotubes

Master's Thesis

Scientific supervisor:

Corresponding Member of RAS, Professor, D.Sc.,

Dmitry A. Indeitsev

Reviewer:

Dr. of Tech. Sciences, Lead Scientist,

Andrei K. Abramian

Saint-Petersburg

2016

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Физическая модель	8
1.1. Уравнения движения	8
1.2. Параметры механической системы.....	10
Глава 2. Численный метод	13
2.1. Интегрирование уравнений движения.....	13
2.2. Компьютерная программа.....	15
Глава 3. Полученные результаты	16
3.1. Режим скачкообразного перемещения воды.....	16
3.2. Возникающие эффекты при изменении размеров трубки в режиме скачкообразного движения воды.....	19
3.3. Исследование течения смеси воды с метаном	22
3.3.1. Смесь 50% воды, 50% метана	22
3.3.2. Смесь 75% воды, 25% метана	25
3.3.3. Влияние состава смеси внутри трубки на скорость течения...	28
Заключение	30
Список использованной литературы	31

Введение

Углеродные нанотрубки были открыты в 1991 году ученым из лаборатории NEC Сумио Ииджима. Они представляют собой трубчатые структуры, образованные атомами углерода, диаметр которых равен лишь нескольким нанометрам, а длина может достигать нескольких микрон. Такие ультратонкие углеродные трубки демонстрируют превосходные механические, электрические и тепловые свойства и имеют большой потенциал для практического применения в нанокompозитах, наноустройствах и наноэлектронике [1]. В настоящее время среди ученых и инженеров есть большие надежды на то, что углеродные нанотрубки могут обеспечить инновационное развитие почти во всех существующих отраслях промышленности, медицины, сельского хозяйства, экологии, биотехнологий, информационных технологий и энергетики.

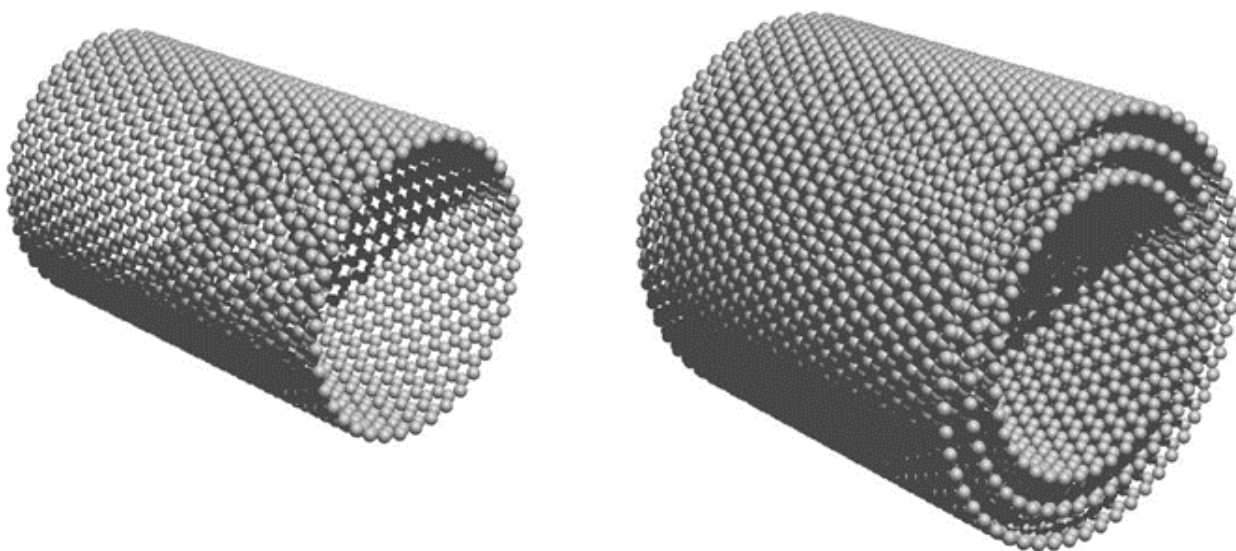


Рис. 1. Одностенная и многостенная нанотрубки

Существуют два типа углеродных нанотрубок: одностенные и многостенные трубки (Рис. 1). Одностенные нанотрубки ОСНТ (single-walled

nanotubes — SWNT) можно рассматривать в виде свернутых в полый цилиндр плоскостей графена, состоящих из правильных шестиугольников с атомами углерода в вершинах (Рис. 2).

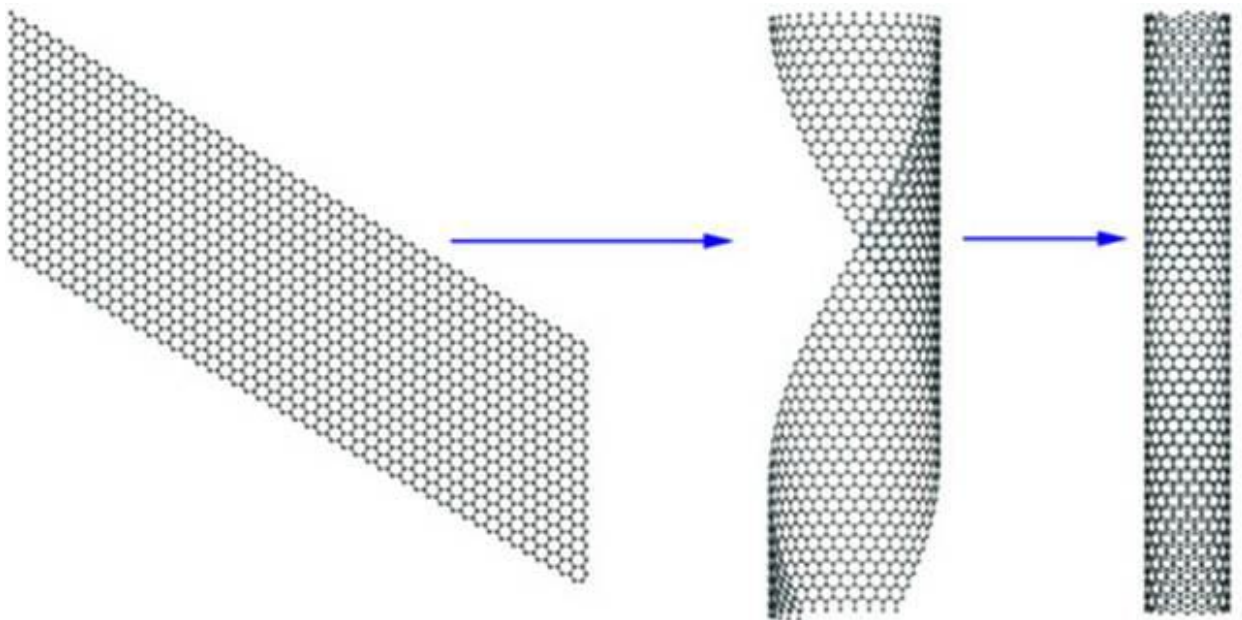


Рис. 2. Создание трубки из листа графена

Многостенные нанотрубки МСНТ (multi-walled nanotubes — MWNT) представляют собой структуру, состоящую из нескольких «вложенных» друг в друга однослойных нанотрубок (Рис. 1). Расстояние между ними равно 0.34 нм, то есть такое же, как и между слоями в кристаллическом графите.

Благодаря своим уникальным свойствам (высокая прочность (63 ГПа), сверхпроводимость, капиллярные, оптические, магнитные свойства и т.д.) углеродные нанотрубки могут найти применение в огромном количестве областей в качестве добавок в полимеры, катализаторов (автоэлектронная эмиссия для катодных лучей осветительных элементов, плоские панели дисплеев, газоразрядные трубки в телекоммуникационных сетях), для поглощения и экранирования электромагнитных волн, преобразования

энергии; в качестве анодов в литиевых батареях, для хранения водорода, усиления композитов, как датчики и суперконденсаторы [2].

Одной из самых перспективных областей применения углеродных нанотрубок является их использование в качестве наноканалов для переноса различных жидкостей. Например, в медицине они могут использоваться для очень быстрой доставки лекарств в нужные области живого организма. В основе такой возможности лежат полученные сравнительно недавно экспериментальные данные, свидетельствующие об очень высокой скорости протекания воды и других жидкостей в углеродных нанотрубках [3 - 7]. Согласно этим данным, средняя скорость течения жидкостей в таких трубках может в сотни и даже тысячи раз превышать величины, предсказанные классической гидродинамикой [8]. В работе [9] было установлено, что течение воды в углеродной нанотрубке можно полностью описать с помощью уравнений механики сплошных сред. Однако, в работе [10] показано, что при помощи метода молекулярной динамики можно обнаружить множество интересных эффектов при исследовании течения жидкости в трубках нано размеров. Таким образом природа и характер движения жидкостей в наноразмерных каналах изучены не до конца. Также не исследован вопрос о влиянии структуры нанотрубки и ее дефектов на течение жидкости. Более того, наличие или отсутствие каких-либо эффектов связанных с жидкостью окружающей нанотрубку также ранее не обсуждалось. В связи с этим, целью работы является подробное исследование свойств течения жидкости в углеродных нанотрубках.

В первой главе данной работы описана физическая модель рассматриваемой системы, состоящей из углеродной нанотрубки и молекул жидкости внутри и снаружи трубки. Во второй главе описан численный метод, используемый для описания механической системы и рассмотрены особенности программы, созданной для решения поставленной задачи. В

третьей главе представлены полученные результаты: в разделе 3.1 описано обнаружение режима скачкообразного перемещения воды в углеродной нанотрубке, влияние размеров трубки на параметры движения в таком режиме описано в разделе 3.2. В разделе 3.3 исследовано течение смеси воды с метаном. В разделе 3.3.1 показана зависимость скорости течения смеси 50% воды, 50% метана от структуры углеродной нанотрубки. В разделе 3.3.2 показана зависимость скорости течения смеси 75% воды, 25% метана от состава смеси снаружи трубки. В разделе 3.3.3 исследовано влияние содержания метана в составе смеси внутри трубки на скорость течения и найдена аппроксимация зависимости скорости от процентного соотношения воды и метана в смеси функцией ax^b .

Глава 1. Физическая модель

1.1. Уравнения движения

В работе исследуется поведение воды и смеси воды с метаном в углеродной нанотрубке. Для моделирования движения жидкости в трубках будем применять метод молекулярной динамики. Данный метод основывается на рассмотрении движения множества из N атомов, взаимодействующих как между собой, так и с внешним силовым полем. В общем случае атомы могут быть «собраны» в молекулы и двигаться согласованно, как единое тело. На каждый k -ый ($k=1\dots N$) атом действуют силы со стороны окружающих его атомов, соответственно уравнения движения для k -го атома можно записать в виде[11]:

$$m_k \ddot{\mathbf{r}}_k = \sum_{n=1, n \neq k}^N \mathbf{f}_{kn} + \mathbf{g}_k \quad (1)$$

где m_i , \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i – масса, радиус-вектор и скорость i -го атома ($i=1, \dots, N$), \mathbf{f}_{kn} – сила взаимодействия между k -ым и n -ым атомами (Рис.3а), \mathbf{g}_k внешняя сила направленная вдоль оси трубки, приложенная к атомам жидкости и обеспечивающая их движение. Величина силы \mathbf{f}_{kn} зависит от расстояния между атомами и определяется как:

$$\mathbf{f}_{kn} = f(|\mathbf{r}_{kn}|) \frac{\mathbf{r}_{kn}}{|\mathbf{r}_{kn}|}, \quad (2)$$

где $f(r) = -\frac{\partial U(r)}{\partial r}$, $U(r)$ – потенциал взаимодействия, $\mathbf{r}_{kn} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n$.

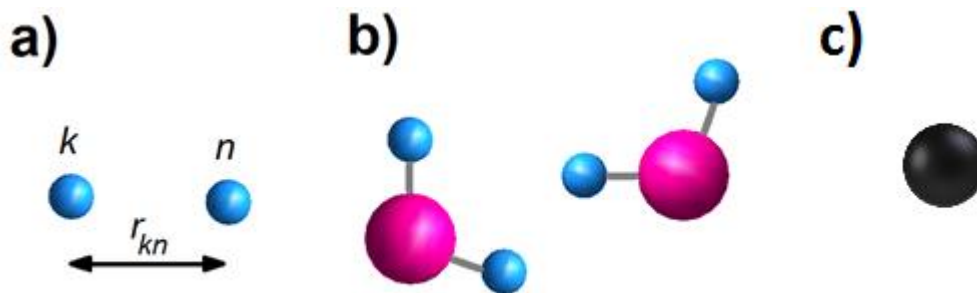


Рис. 3.

Принятая в работе модель молекулы воды представлена на Рис. 3б (синим показаны атомы водорода, а красным кислорода), а на Рис. 3с черным показан атом метана. Уравнения движения центра тяжести молекулы воды записывается в виде:

$$M_k \ddot{\mathbf{R}}_k = \sum_{n=1, n \neq k}^N \mathbf{F}_{kn} + \mathbf{G}_k, \quad (3)$$

где M_k , \mathbf{R}_k , \mathbf{V}_k , \mathbf{G}_k – масса, радиус-вектор, скорость и внешняя сила молекулы, $\mathbf{F}_{kn} = \mathbf{f}_{kn}^O + \mathbf{f}_{kn}^{H_1} + \mathbf{f}_{kn}^{H_2}$, – главный вектор сил, $\mathbf{f}_{kn}^O, \mathbf{f}_{kn}^{H_1}, \mathbf{f}_{kn}^{H_2}$ – силы действующие со стороны n-го атома на атомы данной молекулы.

Вращение k-ой молекулы воды, вокруг ее центра тяжести описывалось уравнением:

$$J \dot{\boldsymbol{\omega}}_k = \mathbf{M}_k, \quad (4)$$

где \mathbf{M}_k – главный вектор моментов, $\boldsymbol{\omega}_k$ – угловая скорость, J – момент инерции.

Моделирование методом молекулярной динамики представляет собой решение задачи Коши для уравнений движения. Начальные условия составляют координаты и скорости каждого атома. Формирование начальных и граничных условий является отдельной задачей, так как они влияют на полученный результат моделирования. Задание начальных условий происходит на двух масштабных уровнях, которые условно можно назвать макро- и микроскопическим. На макроскопическом уровне задаются внешняя форма объектов моделирования (трубка и вода) и их макроскопические скорости. На микроуровне задается вид упаковки частиц (структура материала) и скорости хаотического движения (тепловое движение) [11].

1.2. Параметры механической системы

Принятое в работе взаимодействие между атомами описывается с помощью сил Ван-дер-Ваальса (межмолекулярных сил), математически выражаемых потенциалом Леннарда-Джонса:

$$U = 4 \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (5)$$

где σ и ε – материальные константы для данной конкретной пары взаимодействующих атомов (при $r = \sigma$ — потенциал становится равным нулю, ε — глубина «потенциальной ямы»), r – расстояние между атомами. Типичный вид потенциала представлен на Рис 4.

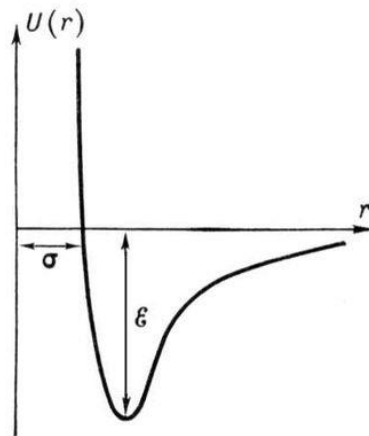


Рис. 4. Вид потенциала Леннарда-Джонса

Для описания взаимодействия различных атомов между собой в работе использовались следующие константы [12]:

$$\varepsilon_{\text{OO}} = 1.08 * 10^{-20} \text{ Дж}, \quad \sigma_{\text{OO}} = 3.166 * 10^{-10} \text{ м},$$

$$\varepsilon_{\text{MM}} = 2.046 * 10^{-20} \text{ Дж}, \quad \sigma_{\text{MM}} = 3.817 * 10^{-10} \text{ м},$$

$$\varepsilon_{\text{MC}} = 1.106 * 10^{-20} \text{ Дж}, \quad \sigma_{\text{MC}} = 3.6085 * 10^{-10} \text{ м},$$

$$\varepsilon_{\text{MO}} = 1.83954 * 10^{-20} \text{ Дж}, \quad \sigma_{\text{MO}} = 3.214 * 10^{-10} \text{ м},$$

$$\varepsilon_{\text{CO}} = 0.4 \varepsilon_{\text{OO}}, \sigma_{\text{CO}} = 1.06 \sigma_{\text{OO}}$$

$$\varepsilon_{\text{CH}} = \sigma_{\text{CH}} = \varepsilon_{\text{OH}} = \sigma_{\text{OH}} = \varepsilon_{\text{HH}} = \sigma_{\text{HH}} = 0.$$

Здесь нижние индексы обозначают пару взаимодействующих атомов (С, Н или О), например, СО - углерод – кислород, и т.п.

Дополнительно к силам Ван-дер-Ваальса (5), учитывалось влияние электростатических сил между атомами. Для описания этих сил использовался потенциал в виде:

$$U^C = q_n q_m \left[\frac{1}{r} + \frac{r}{r_c^2} - \frac{2}{r_c} \right], \quad (6)$$

где q_n и q_m – материальные константы [12], n и m - обозначают тип атома (кислород, водород или углерод). $q_O = -1.31 * 10^{-19}$ Кл, $q_H = 0.65 * 10^{-19}$ Кл, $q_C = 0$), а $r_c = 3 \sigma_{\text{OO}}$.

На Рис. 5 представлены графики величин сил $f(r) = -\frac{\partial U(r)}{\partial r}$ и

$$f^C(r) = -\frac{\partial U^C(r)}{\partial r} \text{ для различных пар атомов.}$$

Молекулы разных жидкостей могут взаимодействовать различными способами: только на основе потенциала Леннарда-Джонса без электростатического взаимодействия (жидкость первого типа), либо и на основе потенциала Леннарда-Джонса и электрического потенциала (жидкость второго типа). Вода относится к жидкостям второго типа, а метан является жидкостью первого типа. Моделирование проводилось при постоянной температуре 300 К, поддерживаемой при помощи термостата.

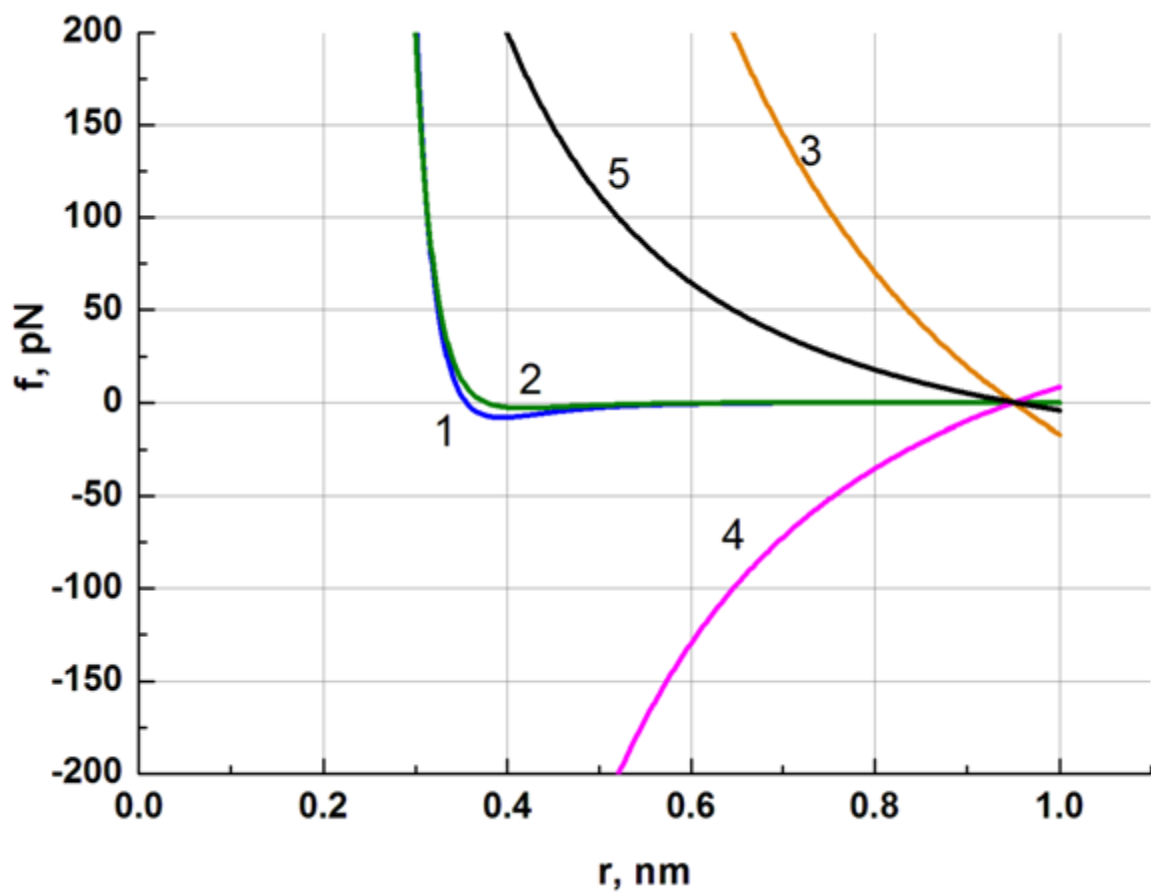


Рис. 5. Сила взаимодействия для различных пар атомов. Сила Леннарда-Джонса: 1 – кислород-кислород; 2 – кислород-углерод. Электростатическая сила: 3 – кислород-кислород, 4 – кислород-водород, 5 – водород-водород.

Глава 2. Численный метод

2.1. Интегрирование уравнений движения

Особенность метода молекулярной динамики состоит в необходимости интегрирования очень большого числа уравнений, что накладывает определенные требования по экономии компьютерной памяти. Кроме того, при расчетах основное время уходит на вычисление силы, действующей на данную частицу – правая часть уравнений движения. Связано это с существенной нелинейностью силы взаимодействия и необходимостью суммирования большого числа слагаемых (прежде всего сил взаимодействия с соседними частицами). Указанное обстоятельство снижает эффективность методов, требующих на каждом шаге многократного вычисления правой части уравнений. С этим, в частности, связано то, что метод Рунге–Кутты редко применяется в методе частиц. Одним из наиболее распространенных является используемый метод, в котором скорость положение частицы вычисляется по следующей формуле: $\mathbf{r}(t + dt) = 2\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t - dt) + \mathbf{w}(t)dt^2$, где dt – шаг интегрирования, $\mathbf{w}(t)$ – ускорение частицы, получаемое подстановкой рассчитанных значений $\mathbf{r}(t)$ в правую часть уравнений движения.

При расчете методом молекулярной динамики большая часть компьютерного времени уходит на вычисление сил взаимодействия между атомами. Для ускорения расчета потенциал взаимодействия обычно обрезается на некотором заданном расстоянии r_c (в нашем случае $r_c = 3 \sigma_{OO}$, где $\sigma_{OO} = 3.166 * 10^{-10}$ м). Если расстояние между частицами больше чем r_c , то считается, что взаимодействие между частицами пренебрежимо мало и оно может не учитываться в расчетах. Таким образом для расчетов, производимых в данной работе, пространство разбивается на кубические ячейки с ребром r_c . Для частиц, находящихся в отдельной ячейке,

рассматривается взаимодействие только с частицами находящимися в пограничных с ней ячеек. Таким образом, удастся добиться, что число операций оказывается пропорциональным числу частиц. Данный метод допускает эффективное распараллеливание при использовании многопроцессорных компьютеров[11].

В данной работе для реализации параллельного счета все ячейки разбиваются на пары, которые могут быть одновременно обработаны на одном шаге по времени. Распараллеливание идет по различным типам пар ячеек. На Рис. 6 показан пример выбора таких пар, в которых можно одновременно независимо проводить вычисления, они показаны разным цветом. Таким образом ячейки не пересекаются, что позволяет применить параллельные вычисления.

Все расчеты, приводимые в данной работе, проводились с помощью оригинальной компьютерной программы, разработанной специально для этой задачи.

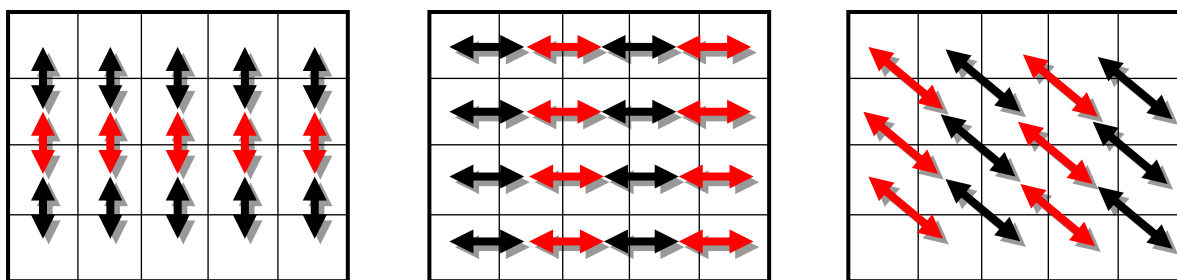


Рис. 6. Реализация параллельных вычислений.

2.2. Компьютерная программа

Для проведения расчетов была разработана компьютерная программа. Метод используемый для ее составления позволяет получать результаты для систем с большим числом частиц. Счетные параметры программы представлены в таблице:

N	30,000	100,000	500,000	1,000,000	10,000,000	20,000,000
T, сек	0.1	0.3	1.5	3.1	30.2	56.3

где N – общее число атомов, участвующих в расчете, T – компьютерное время, затраченное на один шаг на ПК i7-3930K.

Также для визуализации была использована библиотека OpenGL, благодаря чему исследование стало более наглядным и удобным для представления результатов. Пример конфигурации системы показан на Рис.7.

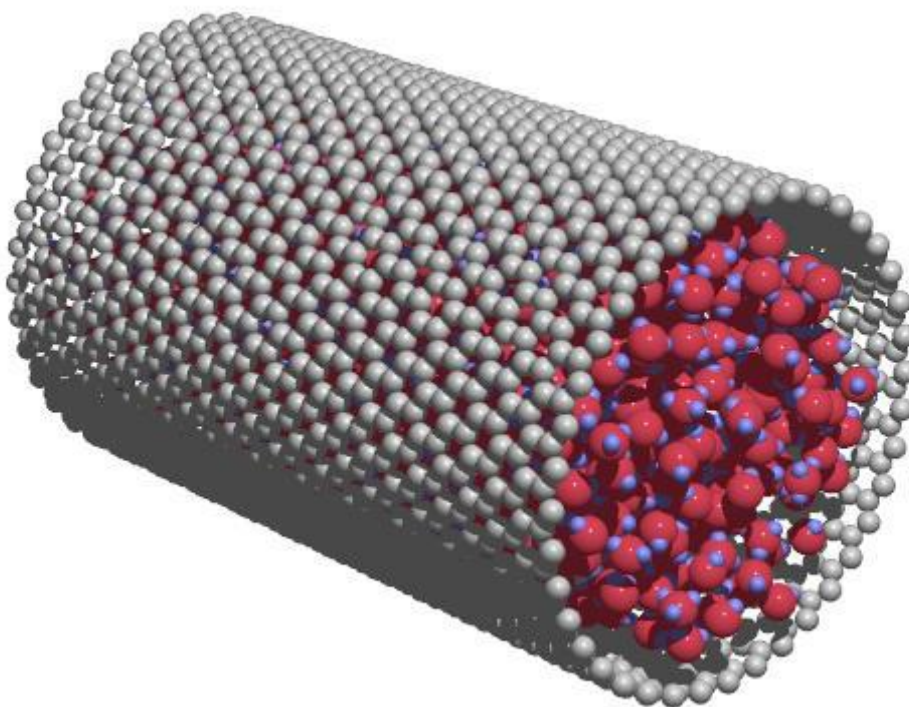


Рис. 7. Молекулы воды в углеродной нанотрубке

Глава 3. Полученные результаты

Исследовались особенности течения воды и смесей воды с метаном в разном процентном соотношении в углеродных нанотрубках. Расчеты проводились для трубок с различными диаметрами сечения и различной структурой. Отметим, что все расчеты, проводились при температуре равной 300К, которая поддерживалась при помощи термостата.

3.1. Режим скачкообразного перемещения воды

Для исследования данной системы была проведена серия расчетов с постепенным уменьшением величины внешней силы.

На Рис. 8 представлены полученные зависимости перемещения воды от времени и от величины внешней силы. Как видно при рассмотрении кривых 3 и 4 (Рис. 8) при значении внешней силы равной 0.1 пН и 0.07 пН движение носит предсказуемый характер, когда перемещение жидкости является линейной функцией времени. При последующем уменьшении величины внешней силы 0.06 пН и 0.05 пН (кривые 2 и 1) форма зависимостей стала меняться, а именно в начальный и достаточно протяженный интервал времени, движение отсутствует, и только после этого наступает режим линейного движения.

На Рис. 9 показаны эти же кривые в увеличенном масштабе. Как видно из Рис. 9 перемещение жидкости на начальном интервале времени может носить достаточно сложный характер, что наиболее проявляется при малой силе (кривая 1). Можно выделить на кривых два участка. На первом (начальном участке) перемещение носит в основном хаотический характер, связанный с тепловым движением молекул. На втором участке перемещение линейно растет во времени.

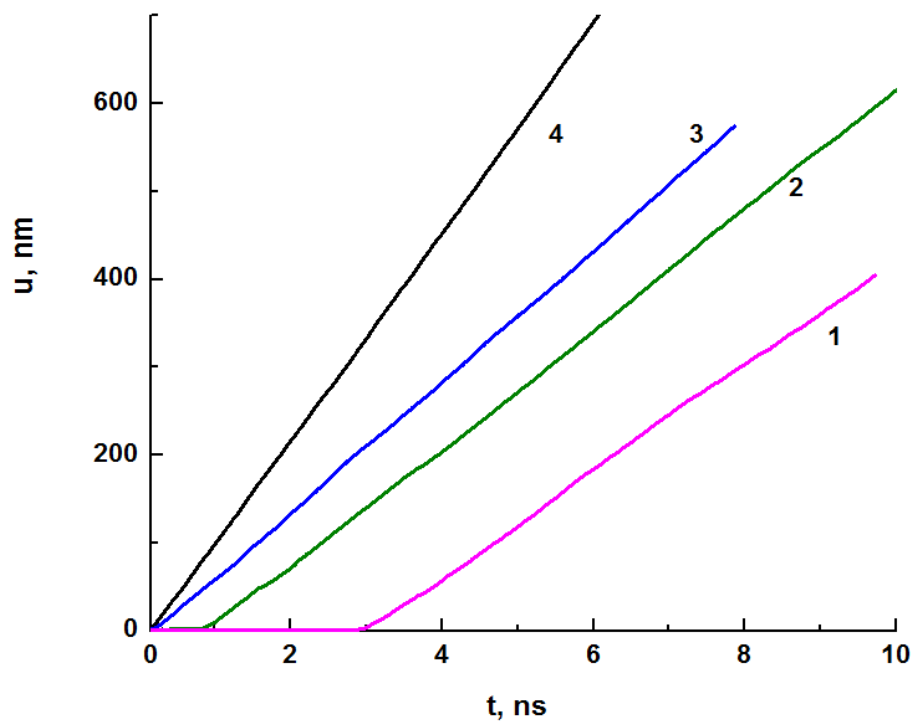


Рис. 8. Зависимость перемещения от времени для разных сил, прикладываемых к молекулам воды внутри трубки: 1 – 0.05 пН, 2 – 0.06 пН, 3 – 0.07 пН, 4 – 0.1 пН.

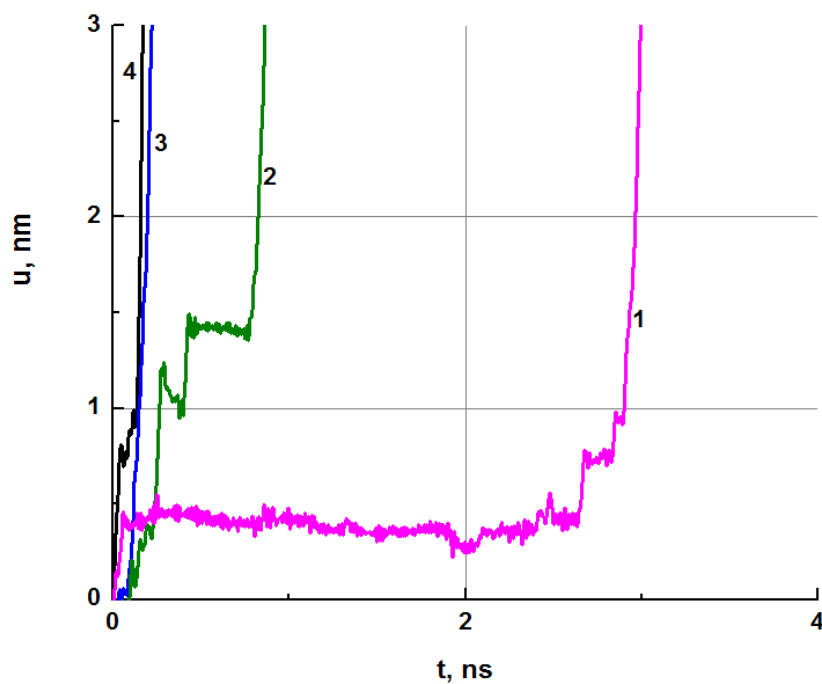


Рис. 9. Зависимость перемещения от времени для разных сил, прикладываемых к молекулам воды внутри трубки: 1 – 0.05 пН, 2 – 0.06 пН, 3 – 0.07 пН, 4 – 0.1 пН.

Как видно из Рис. 9 на начальном участке относительно редко возникают ситуации скачкообразного перемещения жидкости. Через некоторое время первый участок переходит во второй и начинается линейное движения воды без особенностей.

На Рис. 10 представлены зависимости перемещения от времени при еще меньших значениях внешней силы. Кривые посчитаны при внешней силе в 0.02 пН, и 0.03 пН носят ступенчатый характер, а кривая при внешней силе равной 0.01 пН показывает, что здесь поступательного движения практически не происходит, а есть только тепловое.

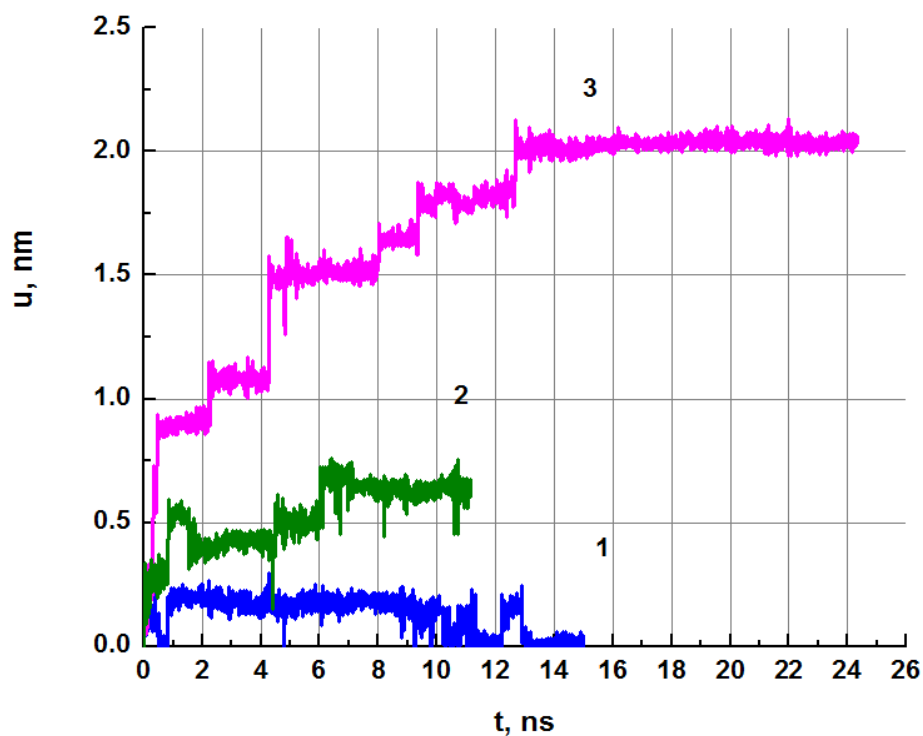


Рис. 10. Зависимость перемещения от времени для разных сил, прикладываемых к молекулам воды внутри трубки: 1 – 0.01 пН, 2 – 0.02 пН, 3 – 0.03 пН.

В данной работе более подробно было исследовано поведение воды в режиме скачкообразного перемещения и рассмотрено влияние размеров трубки на параметры движения в таком режиме.

3.2. Возникающие эффекты при изменении размеров трубки в режиме скачкообразного движения воды

Режим скачкообразного перемещения воды наиболее заметен при очень маленьких радиусах нанотрубки. Поэтому были проведены симуляции движения воды в трубках с радиусами 0.389 нм и 0.428 нм, они показаны на Рис. 11. Расчеты проводились при одинаковой силе, прикладываемой к частицам внутри трубки, равной 3 пН.

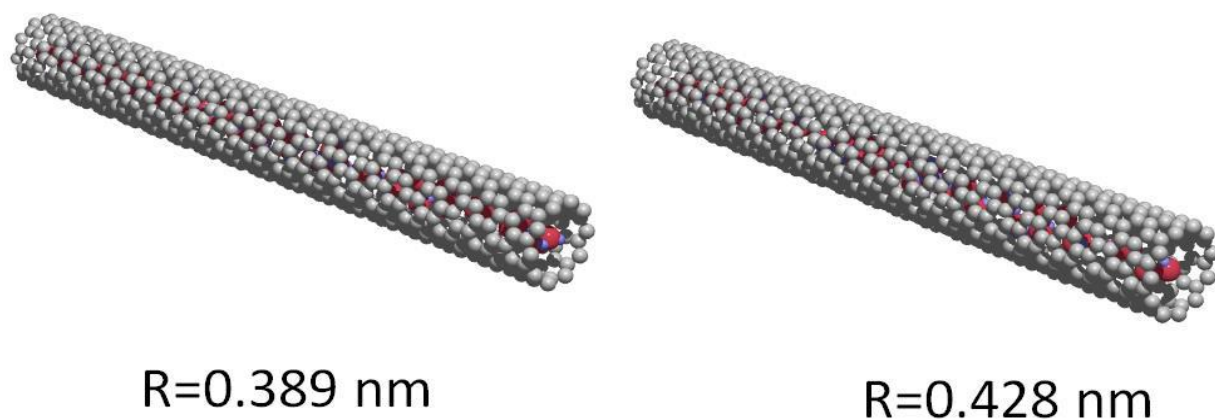


Рис. 11. Конфигурация нанотрубок, использованная в расчетах.

Для представления результатов расчетов, были отмечены участки в которых средняя скорость движения вдоль оси трубки выше нуля. Эти участки показаны на Рис. 12 и Рис. 13, они выбирались таким образом, чтобы в этих участках молекулы воды совершали только тепловое движение и не совершали поступательного движения вперед. При моделировании течения воды в трубке радиуса 0.389 нм было обнаружено формирование участков, распределенных по длине трубки, в которых присутствует положительная

средняя скорость продвижения жидкости вперед и благодаря им реализуется режим скачкообразного перемещения воды в трубке. Для этих участков были посчитаны количественные характеристики, а именно, длина такого участка и занимаемая площадь на графике распределения скорости движения молекул воды по длине трубки. В случае трубки радиуса 0.389 нм длины участков равны 2.8 нм, 4.3 нм и 1.4 нм, а площади соответственно равны 965.44, 1628.31 и 250.37. Это продемонстрировано на Рис. 12. Далее было рассмотрено течение воды в трубке с радиусом увеличенным на 10 %.

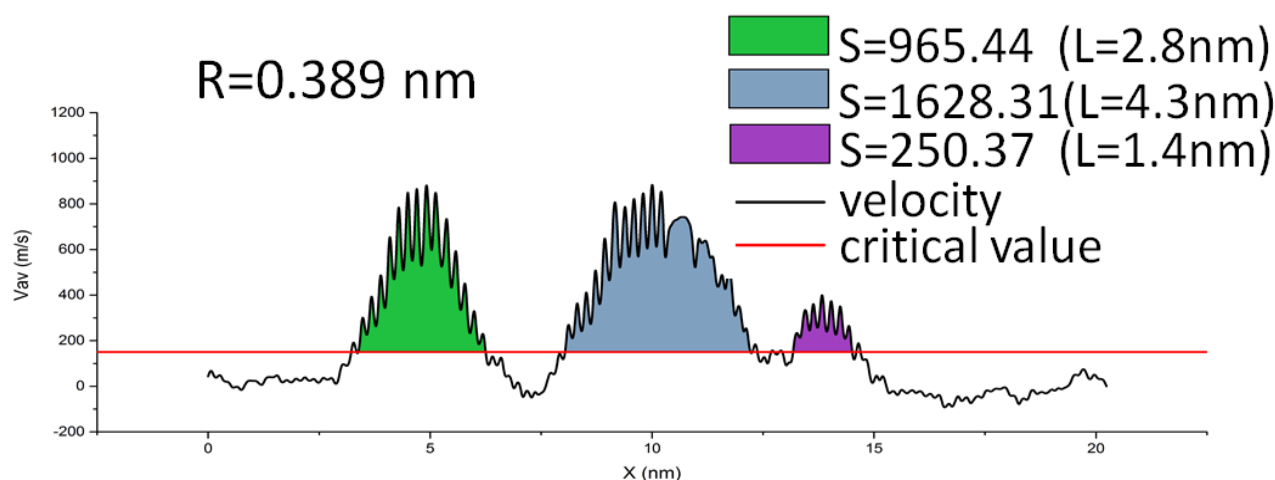


Рис. 12. Распределение скорости молекул воды по длине трубки радиуса 0.389 нм.

На Рис.13 показано распределение скорости молекул воды по длине трубки радиуса 0.428 нм. При моделировании течения воды в трубке радиуса 0.428 нм было обнаружено формирование гораздо больших участков, распределенных по длине трубки, благодаря которым реализуется режим скачкообразного перемещения. Для такого участка тоже были посчитаны количественные характеристики, а именно длина такого участка равна 15.6 нм, а площадь равна 8885.52.

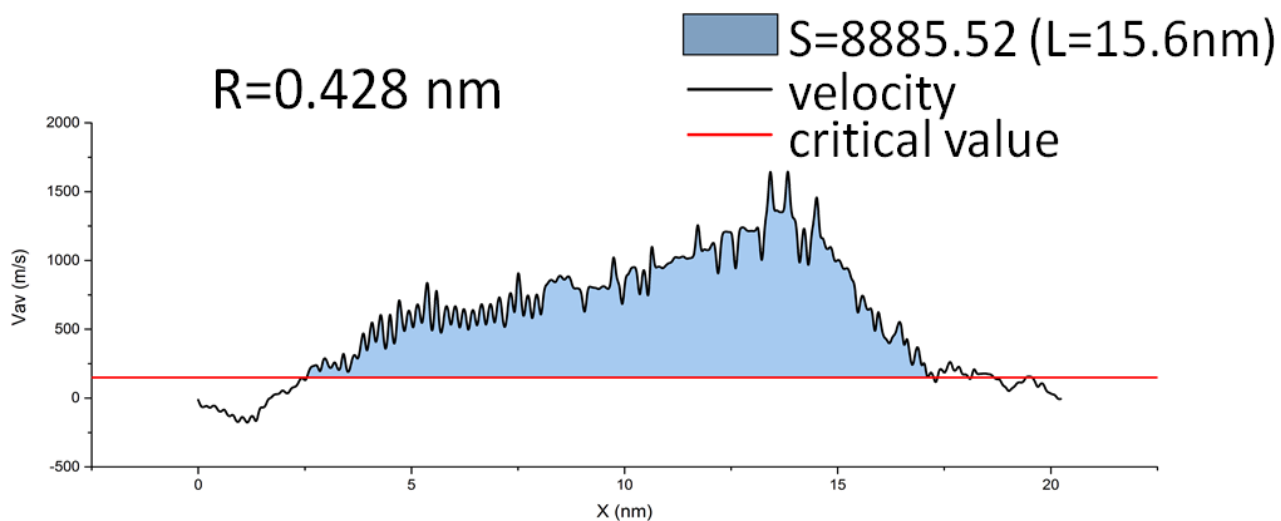


Рис. 13. Распределение скорости молекул воды по длине трубки радиуса 0.428 нм.

Таким образом видно, что даже при небольшом увеличении радиуса нанотрубки наблюдается резкое изменение параметров движения и длина участков, формирующих режим скачкообразного перемещения значительно возрастает. А при дальнейшем увеличении радиуса трубки длина этих участков еще больше возрастает и скачкообразное перемещения труднее наблюдается.

3.3. Исследование течения смеси воды с метаном

С практической точки зрения интересно исследовать не только течение воды, но и различных смесей. В данной работе рассматриваются смеси воды с метаном в различном процентном соотношении. Подробно рассмотрены случаи равных долей (50% воды, 50% метана) и при большем содержании воды (75% воды, 25% метана). А также рассмотрено различное содержание метана в смеси с целью выявления зависимости скорости течения от объемной доли метана в смеси.

3.3.1. Смесь 50% воды, 50% метана

Течение смеси с равными долями воды и метана исследовано в одностенной углеродной нанотрубке радиусом 1.5158 нм, окруженной водой и внешней силе, прикладываемой к молекулам внутри трубки равной 0.5 пН. Кроме стандартной углеродной трубки также были рассмотрены трубки с различной хиральностью, с дефектами структуры и с прямоугольной структурой, которые представлены на Рис. 14. Для этих случаев была исследована скорость течения смеси внутри трубки с целью понять в трубке с какой структурой жидкость течет быстрее, а где медленнее. Так как в зависимости от целей может требоваться мгновенная доставка или наоборот длительная. В результате компьютерного эксперимента получилось, что наиболее быстрое течение смеси в углеродной нанотрубке с хиральностью 15 градусов (№1 на Рис. 14). Затем следует смесь в трубке с углом хиральности 37 градусов (№2 на Рис. 14). Далее группой с одинаковой скоростью движется смесь в трубках с хиральностью 30 градусов (№3 на Рис. 14), 33 градуса (№4 на Рис. 14) и в стандартной трубке с нулевой хиральностью (№5 на Рис. 14). Затем значительно более медленное течение смеси в трубке с дефектами структуры (№6 на Рис. 14) и еще медленнее течение в трубке с прямоугольной структурой (№7 на Рис. 14). Зависимость перемещения от времени для всех этих случаев представлена на Рис. 15.

Такое поведение объясняется именно структурой трубки. Так как в случаях более медленного течения продвижению вперед препятствуют атомы углерода расположенные так, что молекуле воды или метана требуется большая сила чтобы преодолеть барьер.

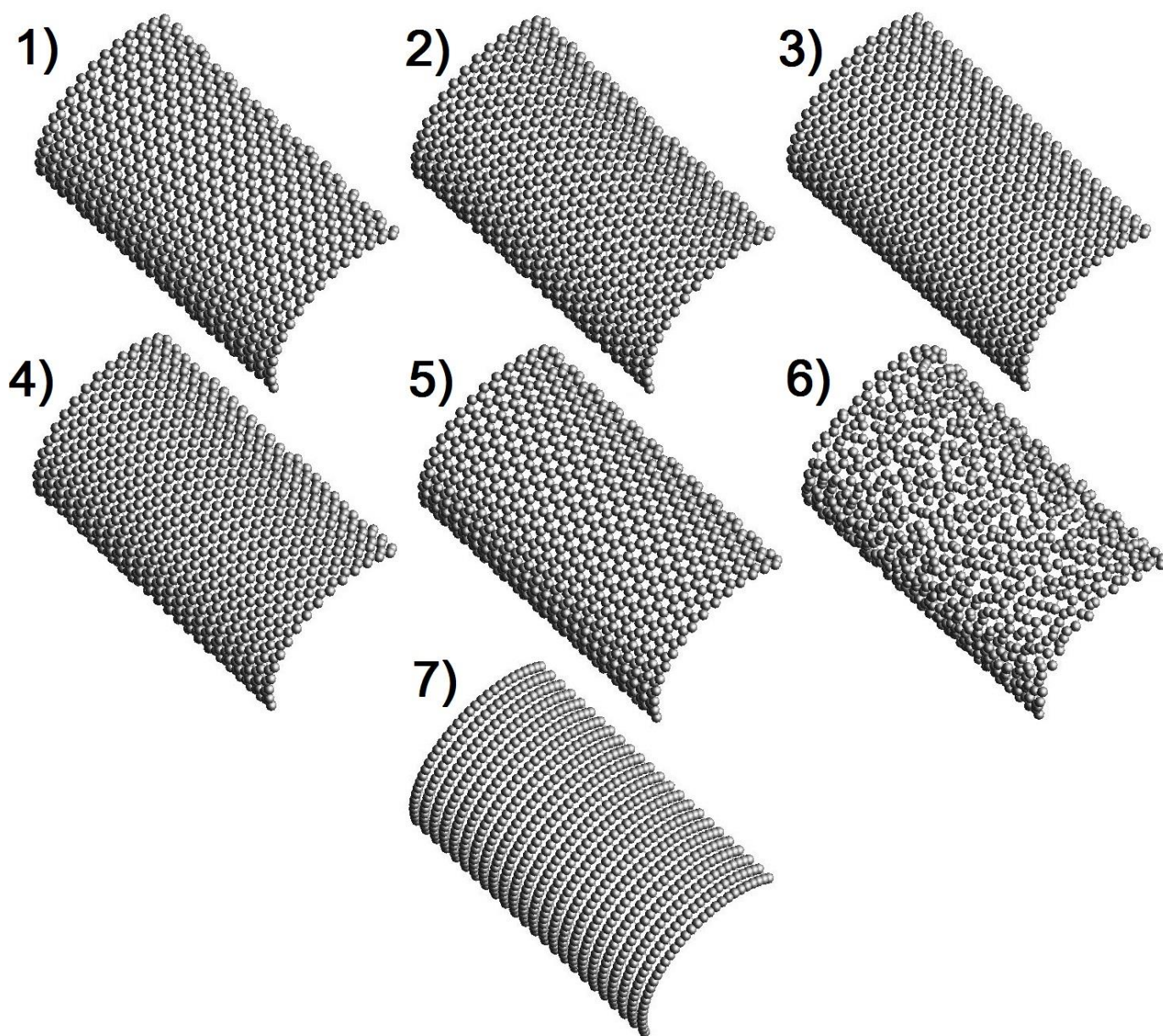


Рис. 14 . Структуры трубки: 1- угол хиральности 15° , 2- угол хиральности 37° , 3- угол хиральности 30° , 4- угол хиральности 33° , 5- угол хиральности 0° (стандартная трубка), 6- трубка с дефектами структуры, 7- прямоугольная структура трубки.

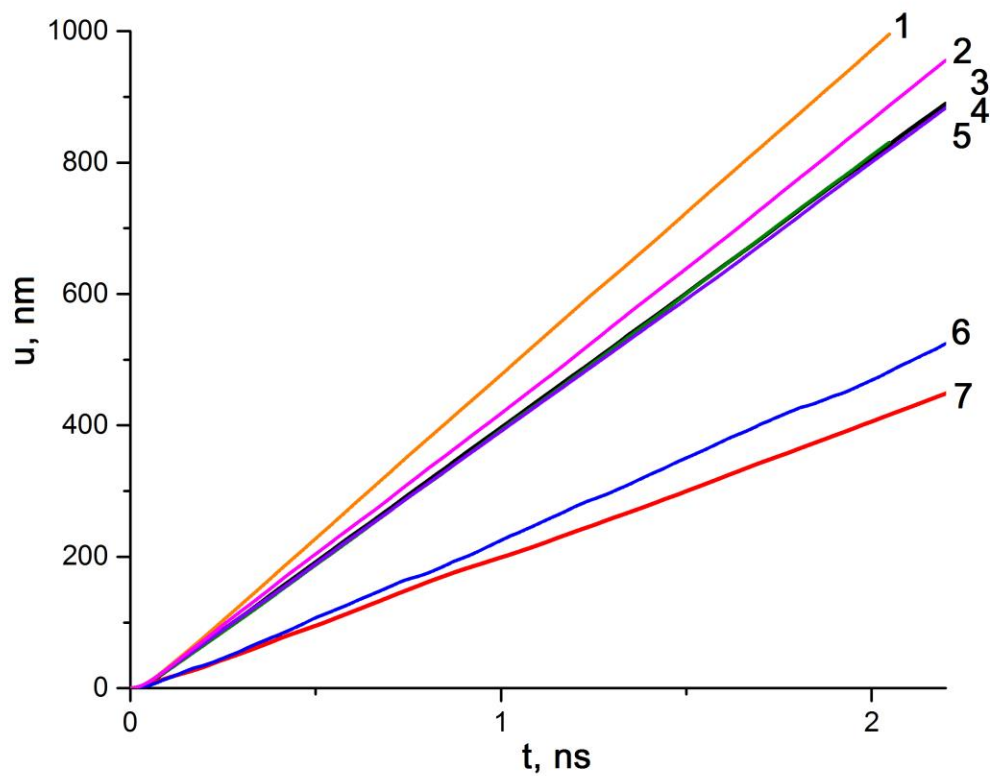


Рис. 15. Зависимость перемещения от времени для смеси 50% воды, 50% метана внутри трубки и 100% воды снаружи трубки при следующих структурах трубки: 1- угол хиральности 15° , 2- угол хиральности 37° , 3- угол хиральности 30° , 4- угол хиральности 33° , 5- угол хиральности 0° (стандартная трубка), 6- трубка с дефектами структуры, 7- прямоугольная структура трубки.

3.3.2. Смесь 75% воды, 25% метана

Зачастую в воду добавляется небольшое количество другого вещества, поэтому дальше было решено исследовать смесь с меньшим содержанием метана. Течение смеси с 75% воды и 25% метана исследовано в одностенной углеродной нанотрубке радиусом 1.5158 нм, окруженной также смесями воды с метаном в разном процентном соотношении и внешней силе, прикладываемой к молекулам внутри трубки равной 0.1 пН. Эта серия расчетов была проведена с целью понять как ведет себя смесь воды с метаном окруженная снаружи различными смесями. Конфигурации смеси, которые получились в результате расчетов представлены на Рис. 16, были рассмотрены варианты, когда снаружи только метан (№1 на Рис. 16), смесь 25% воды, 75% метана (№2 на Рис. 16), 50% воды, 50% метана (№3 на Рис. 16), 75% воды, 25% метана (№4 на Рис. 16), только вода (№5 на Рис. 16) снаружи трубки.

На Рис. 17 представлена зависимость перемещения от времени для различных смесей снаружи трубки, откуда видно, что смесь 75% воды, 25% метана медленнее всего двигается когда она окружена снаружи трубки только водой, и при дальнейшем уменьшении процентного содержания воды и увеличении содержания метана скорость движения смеси увеличивается. Причем при случае 50% воды, 50% метана происходит заметное увеличение скорости движения и далее оно также продолжается.

Характер зависимости скорости движения от состава смеси показан на Рис. 18. Откуда видно, что при увеличении количества метана в смеси больше чем на 25% начинается более быстрый рост скорости течения. Также начиная с этого участка наблюдается линейная зависимость скорости от концентрации метана.

Такая зависимость объясняется наличием дальнедействующих сил между молекулами воды, за счет чего происходит торможение, в случаях, когда снаружи трубки большой процент содержания воды. А силы Леннарда-Джонса, при помощи которых взаимодействуют атомы метана, наоборот, короткодействующие, что в свою очередь не приводит к торможению течения жидкости.

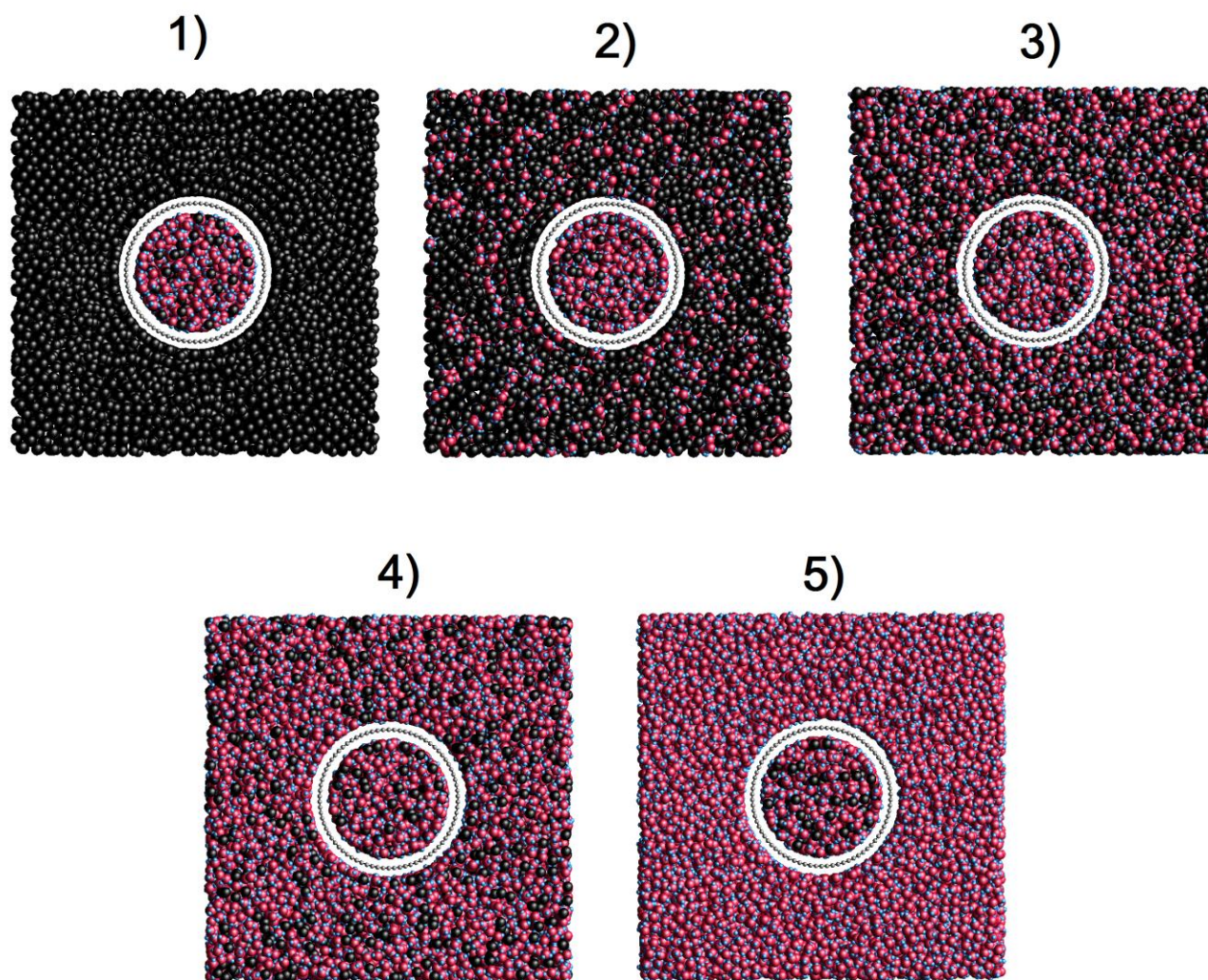


Рис. 16. Конфигурация смеси 75% воды, 25% метана внутри трубки и 1 – 100% метана, 2 – 25% воды, 75% метана, 3 – 50% воды, 50% метана, 4 – 75% воды, 25% метана, 5 – 100% воды снаружи трубки.

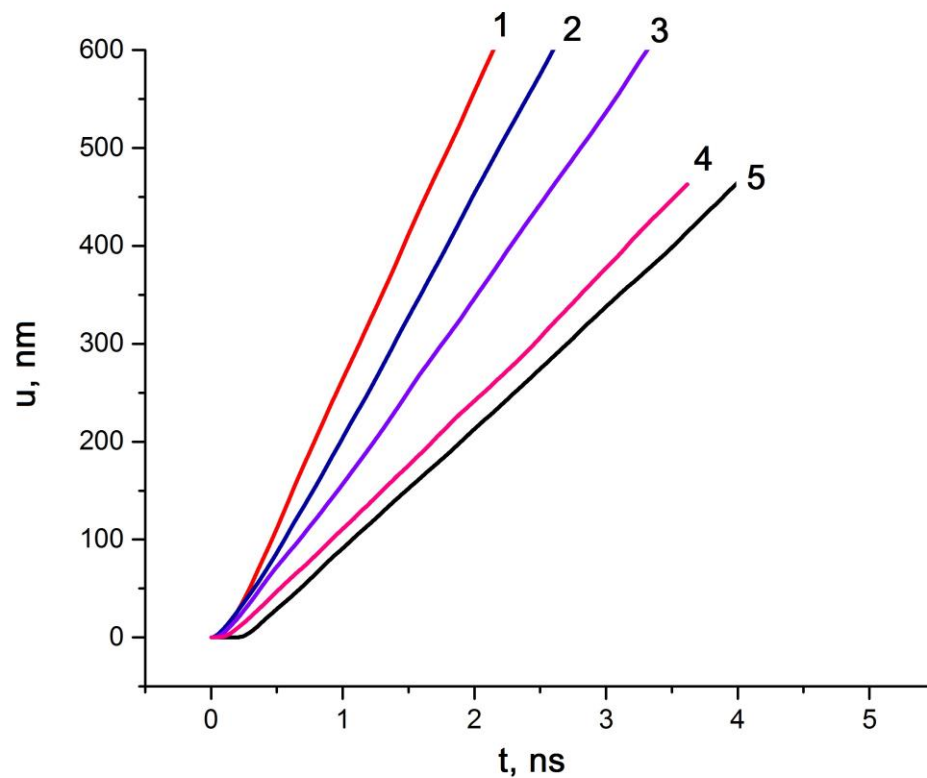


Рис. 17. Зависимость перемещения от времени для смеси 75% воды, 25% метана внутри трубки и 1 – 100% метана, 2 – 25% воды, 75% метана, 3 – 50% воды, 50% метана, 4 – 75% воды, 25% метана, 5 – 100% воды снаружи трубки.

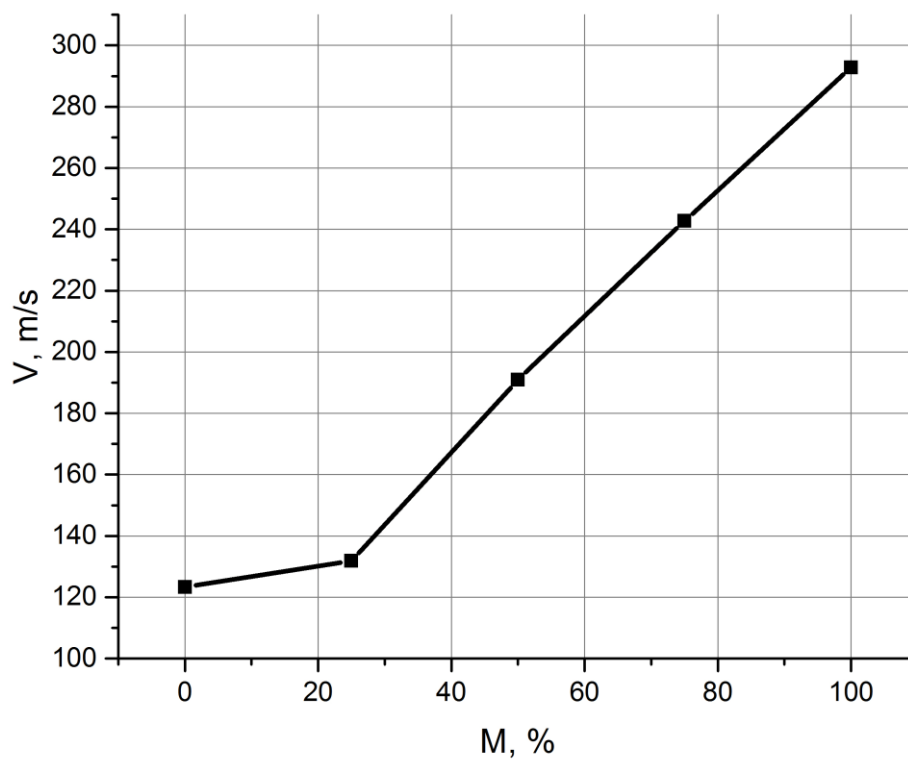


Рис. 18. Зависимость скорости от времени для смеси 75% воды, 25% метана внутри трубки и разных смесей снаружи трубки.

3.3.3. Влияние состава смеси внутри трубки на скорость течения

До этого мы исследовали как влияет структура углеродной нанотрубки на течение смеси внутри трубки, также было исследовано как влияет состав окружающей трубку смеси, но пока не рассматривалось как повлияет на скорость течения состав смеси внутри трубки. Для чистоты эксперимента мы исследовали течение в одностенной углеродной нанотрубке радиусом 1.5158 нм без какого-либо окружения и внешней силы, прикладываемой к молекулам внутри трубки равной 0.1 пН. Была проведена серия расчетов с постепенным увеличением процентного содержания воды в смеси с метаном. Данные расчетов показаны кривой №1 на Рис. 19. Откуда видно, что при увеличении количества воды в смеси скорость течения возрастает.

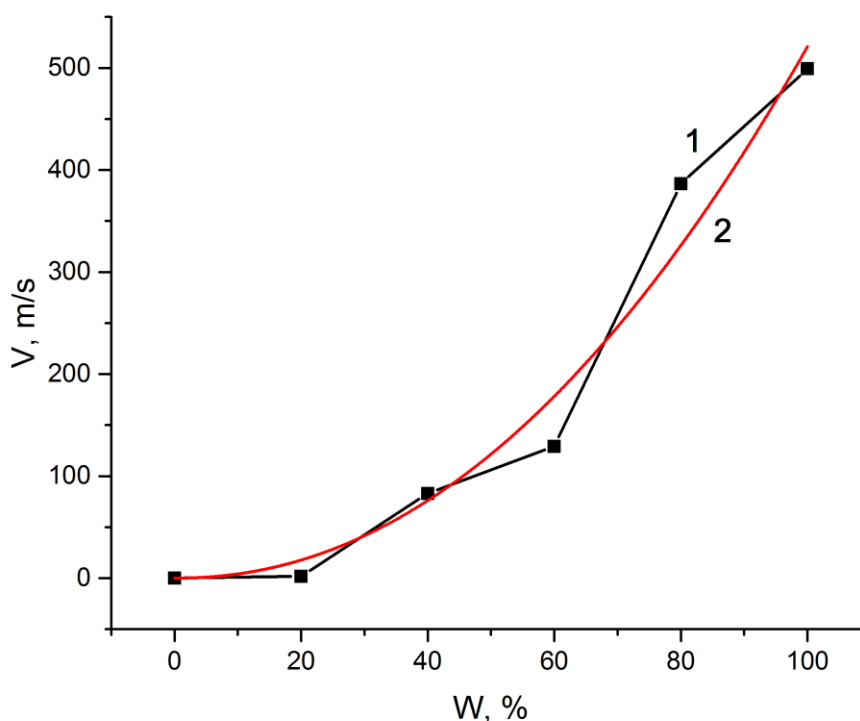


Рис. 19. Зависимость скорости от концентрации смеси внутри трубки без окружающей среды вне трубки: 1 – данные расчета, 2 – аппроксимация функцией ax^b .

Для того чтобы понимать значения скорости в точках, отличных от тех где проведены расчеты, была проведена аппроксимация методом наименьших квадратов по алгоритму Левенберга — Марквардта [13] функцией вида ax^b . Где $a = 0.0326$, $b = 2.10128$, стандартная ошибка a равна 0.05001, стандартная ошибка b равна 0.33227. График данной функции показан кривой №2 на Рис. 19.

Заключение

В работе изложена методика проведения компьютерного эксперимента для исследования механической системы, состоящей из углеродной нанотрубки заполненной молекулами жидкости. При моделировании использовался метод молекулярной динамики.

Подробно исследован режим скачкообразного движения воды в углеродной нанотрубке и рассмотрено влияние размеров трубки на параметры движения в таком режиме. Было установлено, что даже при небольшом увеличении радиуса нанотрубки наблюдается резкое изменение параметров движения и длина участков, формирующих режим скачкообразного перемещения значительно возрастает. А также были измерены количественные характеристики этих участков.

Были исследованы свойства течения смеси воды с метаном. Рассмотрено течение смеси 50% воды, 50% метана в углеродных нанотрубках различной структуры. Показана зависимость скорости течения смеси от структуры нанотрубки.

Рассмотрено течение смеси 75% воды, 25% метана в одностенной углеродной нанотрубке окруженной смесями различного состава. Продемонстрирована зависимость скорости течения смеси от процентного содержания метана в смеси снаружи трубки.

Исследовано влияние состава смеси внутри трубки на скорость течения. Найдена аппроксимация зависимости скорости от процентного соотношения воды и метана в смеси функцией ax^b .

В дальнейшем планируется продолжить расчеты с целью более тщательного изучения найденных эффектов.

Список использованной литературы

1. Wang C. Y., Zhang Y. Y., Wang C. M., Tan V. B. C. - Buckling of Carbon Nanotubes: A Literature Survey - Journal of Nanoscience and Nanotechnology Vol. 7, 4221–4247 - 2007
2. Абдуллаева С., Нагиев Ф. - Наногидромеханика - 2011
3. Lee K., Leese H., Mattia D. - Water flow enhancement in hydrophilic nanochannels – Nanoscale - 2012
4. Li D., Zhang W. - Low speed water flow in silica nanochannel - Chemical Physics Letters, 450 - 2008
5. Majumder M., Chopra N., Andrews R., Hinds BJ. - Nanoscale hydrodynamics: enhanced flow in carbon nanotubes - Nature - 2005
6. Mattia D., Godotsi Y. - Review: static and dynamic behavior of liquids inside carbon nanotubes - 2008
7. Meng X. W., Huang J. P. - Enhanced permeation of single-file water molecules across a noncylindrical nanochannel - Physical Review E 88, 014104 – 2013
8. Mattia D., Leese H. and Lee K. P., - Carbon nanotube membranes: From flow enhancement to permeability - Journal of Membrane Science - 475 (1), pp. 266-272 - 2015.
9. Thomas J., McGaughey A. - Reassessing Fast Water Transport Through Carbon Nanotubes - Nano Letters Vol. 8, No. 9, 2788-2793
10. Schoen P. A., Walther J. H., Arcidiacono S., Poulikakos D., Koumoutsakos P. - Nanoparticle traffic on helical tracks: thermophoretic mass transport through carbon nanotubes - Nano Lett. Sep;6(9):1910-7 - 2006.

11. Кривцов А. М. - Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. - М.: ФИЗМАТЛИТ - 2007.
12. Chopra M., Choudhury N. - Comparison of Structure and Dynamics of Polar and Nonpolar Fluids through Carbon Nanotubes - J. Phys. Chem. C - 117, 18398-18405 – 2013.
13. Philip E. Gill, Walter Murray, Margaret H. Wright - Practical Optimization - Academic Press Inc. – 1981